

Trabalho de Conclusão de Curso – Monografia

Nathan Pratta Teodosio

Bacharelado em Ciências Físicas e Biomoleculares

Simulações Monte Carlo de sistemas frustrados

Orientador: Eric de Castro e Andrade

Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

São Carlos, 31/10/2019

1 Introdução

A Física Estatística, área de grande sucesso na Física, nas últimas décadas ganhou a computação como uma ferramenta extremamente útil. Sistemas que exigiriam um tratamento teórico árduo e talvez intransponível para serem compreendidos podem agora ser tratados computacionalmente para auxiliar nesse objetivo.

Uma técnica extensivamente usada é a de Monte Carlo, a qual, nesse contexto, propõe-se a facilitar a avaliação de médias térmicas no espaço de fase evitando configurações altamente improváveis do sistema e, ao invés disso, fazendo amostragens nas configurações mais representativas. É um poderoso método na modelagem de magnetos com redes de spins, que aqui será apresentada com dois algoritmos em particular, o de Metropolis e de Wolff.

O estudo será feito em redes bidimensionais, quadradas, de tamanho $L \times L$, com L inteiro. Em cada par (X_1, X_2) da rede é colocado um spin, que sofrerá a ação apenas de seus vizinhos imediatos. No caso de aos spins somente se permitir assumir valores 1 e -1, tem-se o famoso modelo de Ising. Se por outro lado os spins puderem ser posicionados em qualquer direção do espaço tridimensional, tem-se o modelo de Heisenberg. Também serão introduzidos defeitos nas ligações que medeiam a ação entre os vizinhos de diferentes formas, simulando a desordem encontrada em alguns materiais.

1.1 Modelo de Ising

No modelo de Ising, tem-se uma rede bidimensional quadrada em que cada sítio corresponde a um spin, que pode assumir valores 1 e -1, e cada um deles interage apenas com seus quatro vizinhos imediatos, denominados primeiros vizinhos (figura 1).

A energia da configuração é

$$E = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + B \sum_i S_i. \quad (1)$$

Em que S_i é o valor do spin no sítio i , B é o campo magnético externo e J a constante de troca magnética. Esta determina a tendência de os spins se alinharem paralela ou antiparalelamente, dependendo se $J < 0$ ou $J > 0$.

Neste projeto, toma-se sempre $B = 0$, de modo que daqui em diante esse termo será omitido. Além disso, são utilizadas condições periódicas de contorno, com o vizinho de cima do sítio (x, L) , na fronteira, sendo $(x, 1)$ e o da direita de (L, y) sendo $(1, y)$.

O sistema fica em contato com um reservatório térmico. Para uma dada temperatura $T \neq 0$, a probabilidade de cada microestado α , isto é, configuração particular da rede com energia E_α , é dada pela distribuição de Boltzmann:

$$P_\alpha = \frac{1}{Z} \exp \frac{-E_\alpha}{k_B T}. \quad (2)$$

k_B é a constante de Boltzmann, que aqui será adotada como unitária ($k_B = 1$). Z é a função de partição, obtida impondo-se $\sum_\alpha P_\alpha = 1$.

Como tratamos de sistemas em equilíbrio, P_α não depende do tempo.

A magnetização total M é simplesmente a soma dos spins da rede, isto é, $M = \sum_i S_i$.

A partir das grandezas anteriores, determinam-se suas flutuações. Por exemplo: Para obter o calor específico, definido por $C = (\partial E / \partial T)_V$, parte-se do valor médio da energia,

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{\alpha} E_{\alpha} \exp\left(-\frac{E_{\alpha}}{k_B T}\right)}{\sum_{\alpha} \exp\left(-\frac{E_{\alpha}}{k_B T}\right)} \quad (3)$$

e da energia quadrática,

$$\langle E^2 \rangle = \frac{\sum_{\alpha} E_{\alpha}^2 \exp\left(-\frac{E_{\alpha}}{k_B T}\right)}{\sum_{\alpha} \exp\left(-\frac{E_{\alpha}}{k_B T}\right)} \quad (4)$$

Tomando a derivada parcial de (3) com relação a $(k_B T)^{-1} \equiv \beta$,

$$\frac{\partial E}{\partial \beta} = \left(\frac{\sum E e^{-E\beta}}{\sum e^{-E\beta}} \right)^2 - \frac{\sum E^2 e^{-E\beta}}{\sum e^{-E\beta}} = \langle E \rangle^2 - \langle E^2 \rangle \quad (5)$$

Então, fica claro que $C = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}$.

Por via semelhante, a susceptibilidade magnética é calculada como $\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{k_B T}$.

O coeficiente de Binder, definido por $U = \frac{3}{2} \left(1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2} \right)$, é útil na identificação de uma transição de fase. A intersecção das curvas de U para redes de diversos tamanhos identifica com alta precisão a temperatura crítica. O fator de $\frac{3}{2}$ é introduzido para normalização, de modo que $U \rightarrow 1$ para $T \rightarrow 0$.

1.2 Modelo de Heisenberg

O modelo de Heisenberg difere do anterior em permitir que os spins se orientem em qualquer direção no espaço tridimensional, mas ainda com módulo 1. Ou seja, cada spin é

$$\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z) : |\mathbf{S}_i| = 1$$

Assim, a generalização natural da energia é

$$E = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (6)$$

e a da magnetização, $\mathbf{M} = \sum_i \mathbf{S}_i$.

χ e C são definidos da mesma forma, mas o coeficiente de Binder passa a ser dado por $U = \frac{5}{2} \left(1 - \frac{3\langle M^4 \rangle}{5\langle M^2 \rangle^2} \right)$. Como anteriormente, o fator de $\frac{5}{2}$ é introduzido para normalização.

1.3 Modelo de Heisenberg com segundos vizinhos

Até então, apenas foram considerados os quatro vizinhos mais próximos. Neste modelo, os outros quatro nas diagonais, denominados segundos vizinhos, também serão considerados (figura 1). Além disso, deve-se diferenciar a interação dos primeiros e dos segundos vizinhos com os parâmetros J_1 e J_2 , respectivamente, e assim surge uma nova expressão para a energia,

$$E = J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle ik \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k \quad (7)$$

Esta alteração origina o fenômeno da frustração: dado J_2 antiferromagnético, não é possível satisfazer os primeiros e segundos vizinhos simultaneamente (figura 2).

Figura 1: Alguns sítios da rede quadrada. Os sítios unidos por segmentos verdes são os primeiros vizinhos do sítio azul; por laranjas, os segundos.

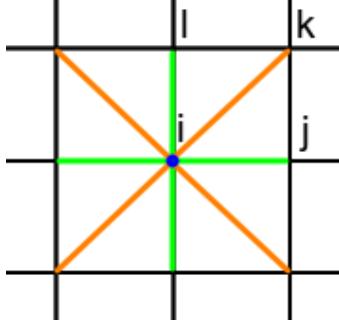
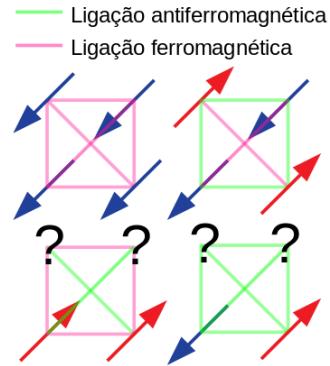


Figura 2: Redes mostrando que a frustração só ocorre se J_2 for antiferromagnética. Spins nos sítios com ‘?’ não podem satisfazer primeiros e segundos vizinhos simultaneamente.



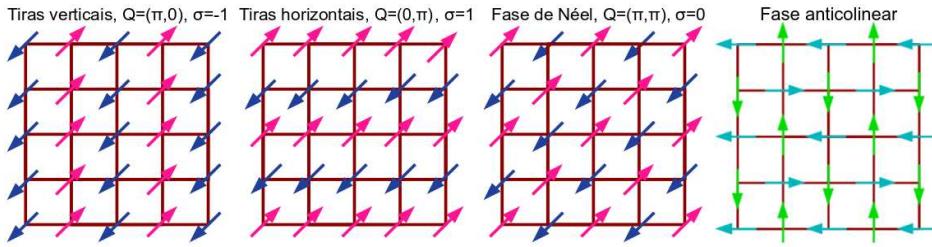
Serão analisados os efeitos da desordem no modelo com a introdução de uma única ligação de primeiro vizinho com parâmetro $J_1 \rightarrow J_1(1 + \Delta)$, inicialmente, e em seguida com desordem generalizada, em que todas as ligações de primeiro vizinho terão $J_1 \rightarrow J_1(1 + \Delta)$ ou $J_1 \rightarrow J_1(1 - \Delta)$, cada qual com probabilidade 1/2.

A introdução de um outro parâmetro de ordem se mostrará conveniente [1]. Definido por

$$\sigma_\alpha = \frac{(\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_k) \cdot (\mathbf{S}_j - \mathbf{S}_l)}{|(\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_k) \cdot (\mathbf{S}_j - \mathbf{S}_l)|} \quad (8)$$

para cada sítio α , em que os rótulos estão na figura 1, nele estão bem codificadas as fases de tiras (figura 3) que serão observadas na análise posterior. Tal parâmetro é do tipo Ising, portanto usa-se como coeficiente de Binder $U = \frac{3}{2} \left(1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2} \right)$.

Figura 3: Visão planar dos ordenamentos possíveis dos estados fundamentais de redes sob o regime de Heisenberg com segundos vizinhos. As tiras caracterizam-se pelo ordenamento ferromagnético em uma direção e antiferromagnético na outra (ou vice-versa). A fase de Néel, pelo antiferromagnético em todas as direções. Constatata-se que estados fundamentais de tiras ocorrem com $J_2/J_1 > 0,5$ e de Néel com $J_2/J_1 < 0,5$. A fase anticolinear também contribui significativamente em alguns casos específicos, como será visto.



1.4 Simulações por Monte Carlo

A fim de determinar os valores médios das variáveis termodinâmicas nos diversos modelos, empregam-se simulações computacionais para fazer diversas amostragens. Como a passagem de um estado a outro do sistema se dá de acordo com uma regra probabilística, essas simulações devem gerar variáveis aleatórias, caracterizando-se como simulações Monte Carlo.

Os algoritmos de amostragem que serão apresentados compartilham entre si ainda outra propriedade: a probabilidade de transição P_{ab} do sistema de um estado a para outro b (a e b quaisquer) não depende do

caminho tomado até a , mas apenas dos próprios estados a e b , por isso P_{ab} é uma constante. Define-se um processo dessa natureza como markoviano. Do estado b gerado a partir de a seguirá um outro estado c , e assim sucessivamente, formando uma cadeia de Markov.

Para atingir o equilíbrio partindo de um estado qualquer, o processo markoviano regendo o sistema deve satisfazer as condições de:

- Ergodicidade: Uma vez que todo estado b tem uma probabilidade de Boltzmann não nula, dado o tempo suficiente (computacionalmente, suficientes passos de Monte Carlo), o sistema deve poder atingir qualquer estado b a partir de qualquer estado a ; e
- Balanço detalhado: Para garantir que após atingido o equilíbrio se estabelecerá a distribuição de probabilidades de Boltzmann, é preciso que $P_a P_{ab} = P_b P_{ba}$. Isto é, o sistema transiciona de a para b tantas vezes quanto de b para a , em média.

É útil trabalhar com as probabilidades de transição representando-as por dois fatores, a probabilidade g_{ab} de o algoritmo gerar o estado b a partir do a e a taxa A_{ab} com que essa transição deve ser realizada. Assim,

$$P_{ab} = g_{ab} A_{ab}$$

e a condição imposta pelo balanço detalhado é

$$\frac{P_{ab}}{P_{ba}} = \frac{g_{ab} A_{ab}}{g_{ba} A_{ba}} = \exp[-\beta(E_b - E_a)] \quad (9)$$

Com esse arcabouço é possível produzir diversos algoritmos para simular por computação o sistema de spins em equilíbrio e assim coletar os valores das variáveis termodinâmicas.

1.5 Algoritmo de Metropolis

Este é um procedimento que gira um spin por vez e, por isso, cada atuação pode alterar a energia da configuração em no máximo $8J$.

As probabilidades de transição a partir de uma configuração a são escolhidas como iguais para cada estado final b . Como cada spin de um total de N pode ser girado, $g_{ab} = 1/N$. A partir disso, obtém-se de (9) a razão entre as taxas de aceitação

$$\frac{g_{ab} A_{ab}}{g_{ba} A_{ba}} = \frac{A_{ab}}{A_{ba}} = \exp[-\beta(E_b - E_a)] \quad (10)$$

O algoritmo de Metropolis utiliza a taxa de aceitação

$$\begin{aligned} A_{ab} &= \exp[-\beta(E_b - E_a)], \text{ se } E_b > E_a \\ A_{ab} &= 1, \text{ caso contrário} \end{aligned} \quad (11)$$

1.5.1 Implementação no modelo de Heisenberg

Em uma rede quadrada de spins, de dimensões LxL, começando com $i = 1$,

1. Gera-se uma direção (x, y, z) aleatória, com $|(x, y, z)| = 1$;
 - (a) Afere-se a variação de energia δE que resultaria se o spin do sítio i estivesse naquela direção;
 - (b) Gera-se um número aleatório $0 \leq r \leq 1$;
 - (c) Se $r \leq \exp \frac{-\delta E}{kT}$, o spin é colocado naquela direção;

- (d) Escolhe-se o próximo sítio ($i = i + 1$) e repetem-se os passos (a) a (d) até que toda a rede tenha sido percorrida.

Gerar uma direção aleatória em três dimensões não é trivial como em duas. O procedimento, descrito em [2], é gerar dois números aleatórios A_1 e A_2 , cada qual no intervalo $[-1, 1]$, até que $A = A_1^2 + A_2^2 < 1$ e então a direção aleatória é $(2A_1\sqrt{1 - A}, 2A_2\sqrt{1 - A}, 1 - 2A)$.

1.6 Passo microcanônico

Esta é uma etapa simples, realizada para diminuir a correlação entre uma configuração e a seguinte, que consiste em refletir um spin em relação ao campo gerado apenas pelos seus primeiros e segundos vizinhos, chamado campo local.

Dado que esse passo não altera a energia da configuração e viola a ergodicidade, não pode ser realizado isoladamente e, assim, deve ser intercalado às rodadas de Metropolis, Wolff ou banho térmico.

1. Afere-se o campo local

$$\mathbf{H}_L = J_1 \sum_{j=1}^4 \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{k=1}^4 \mathbf{S}_k \quad (12)$$

agindo em um spin \mathbf{S}_i da rede gerado pelos vizinhos primeiros \mathbf{S}_j e segundos \mathbf{S}_k ;

2. O spin é refletido por esse campo: $\mathbf{S}_i \rightarrow -\mathbf{S}_i + 2\mathbf{H}_L(\mathbf{H}_L \cdot \mathbf{S}_i)/\mathbf{H}_L^2$;
3. Repetem-se os itens anteriores para todo sítio da rede.

Figura 4: Spin central antes (esquerda) e depois (direita) da ação do passo microcanônico. A seta tracejada vermelha é o campo local e a tracejada azul é o spin original, antes da ação do passo microcanônico.

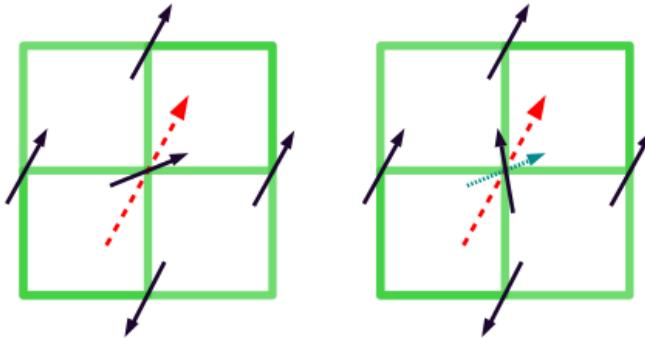
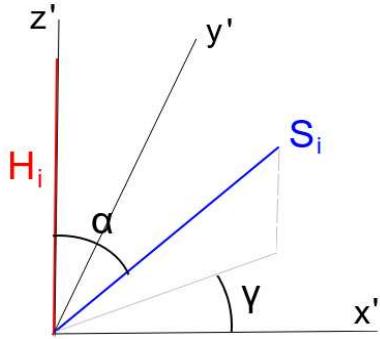


Figura 5: Ângulos α e γ utilizados no algoritmo do banho térmico. γ é o ângulo entre x' e a projeção de \mathbf{S}_i no plano $x'oy'$.



1.7 Banho térmico

Nos modelos abordados só as interações entre vizinhos próximos contribuem para a energia de um spin. Da relação de Boltzmann (2), a distribuição de um spin é

$$P(\mathbf{S}_i, \mathbf{H}_i) = C \exp(-E_i \beta) = C \exp(\beta \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}_i)$$

Então, gerando \mathbf{S}_i conforme essa distribuição cumpre-se diretamente a condição do balanço detalhado. Nisso consiste o algoritmo do banho térmico.

Sendo α o ângulo entre \mathbf{S}_i e \mathbf{H}_i e γ o ângulo azimutal definido pela projeção de \mathbf{S}_i em um plano perpendicular a \mathbf{H}_i (figura 5), determina-se a constante C impondo a normalização,

$$1 = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi P(\mathbf{S}_i, \mathbf{H}_i) \sin \alpha d\alpha d\gamma = C \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \exp(\beta S_i H_i \cos \alpha) \sin \alpha d\alpha d\gamma$$

Escrevendo $w = \beta H_i$, obtém-se

$$C = \frac{w}{2 \sinh w}$$

Pode-se com isso gerar α e γ a partir de dois números aleatórios A e B , cada um distribuído uniformemente em $[0, 1]$.

Uma vez que $P(\mathbf{S}_i, \mathbf{H}_i)$ não depende de γ , deve ser sorteado em uma distribuição uniforme em $[0, 2\pi]$.

$$\gamma = 2\pi A$$

Por sua vez, encontra-se α impondo

$$B = \int_0^\alpha P \sin \alpha' d\alpha' = \frac{w}{2 \sinh w} \int_0^\alpha \exp(w \cos \alpha') \sin \alpha' d\alpha' = -\frac{w}{2 \sinh w} \int_0^{\cos \alpha} \exp(w \cos \alpha') d \cos \alpha'$$

e então, com $x' = \cos \alpha$, obtém-se, $B = (e^w - e^{wx'}) / (2 \sinh w)$. Invertendo,

$$x' = 1 + \frac{\ln[1 - B(1 - e^{-2w})]}{w}$$

Determinou-se assim \mathbf{S}_i com respeito a \mathbf{H}_i , isto é, ao sistema de coordenadas (x', y', z') .

$$\mathbf{S}_i = \sin \alpha \cos \gamma \hat{x}' + \sin \alpha \sin \gamma \hat{y}' + \cos \alpha \hat{z}'$$

Mas isso não basta: Uma vez que cada spin estará sob a ação de um campo local diferente, é necessário expressar \mathbf{S}_i em relação a um sistema de coordenadas universal (x, y, z) .

Definam-se os ângulos θ polar e ϕ azimutal em relação ao sistema universal (x, y, z) tais que

$$\cos \theta = \frac{H_z}{H}, \quad \sin \theta = \sqrt{1 - \cos^2 \theta}, \quad \cos \phi = \frac{H_x}{H \sin \theta}, \quad \sin \phi = \frac{H_y}{H \sin \theta} \quad (13)$$

Então, por fim, tem-se a expressão de um spin i em relação a esse sistema:

$$\begin{aligned} S_i^x &= \sin \alpha \cos \gamma \cos \theta \cos \phi - \sin \alpha \sin \gamma \sin \phi + \cos \alpha \sin \theta \cos \phi \\ S_i^y &= \sin \alpha \cos \gamma \cos \theta \sin \phi - \sin \alpha \sin \gamma \cos \phi + \cos \alpha \sin \theta \sin \phi \\ S_i^z &= \cos \alpha \cos \theta - \sin \alpha \cos \gamma \sin \theta \end{aligned} \quad (14)$$

1.7.1 Implementação no modelo de Heisenberg

Em uma rede de spins LxL, começando com $i = 1$,

1. Afere-se o campo local \mathbf{H}_i , dado por (12), atuando no spin i ;
2. Geram-se dois números aleatórios A e B e, com eles, $\gamma = 2\pi A$ e $x = 1 + \frac{\ln[1 - B(1 - e^{-2w})]}{w}$;
3. Calculam-se os senos e cossenos dos ângulos:

- α : $\cos \alpha = x$, $\sin \alpha = \sqrt{1 - \cos^2 \alpha}$;
- γ : Diretamente;
- θ e ϕ : Conforme (13).

4. Atribui-se a \mathbf{S}_i as componentes dadas por (14);
5. Escolhe-se o próximo sítio ($i = i + 1$) e repetem-se os passos até que toda a rede tenha sido percorrida.

Este algoritmo tem uma clara vantagem sobre o de Metrópolis: Ele não gasta tempo computacional rejeitando uma ação (a taxa de aceitação é unitária). Todavia, a desvantagem é que cada passo é mais lento devido à maior quantidade de operações.

1.8 Minimização

Procura o estado fundamental a partir de uma configuração de spins dada. Esta, na prática, não deve ser qualquer, pois o algoritmo é suscetível a ficar preso em estados metaestáveis. Assim, é preferível fornecer uma configuração já na mais baixa temperatura simulada, que estará mais próxima ao estado fundamental.

Para cada spin da rede:

1. Determina-se o campo local \mathbf{H}_L dado por (12) agindo em um sítio;
2. Alinha-se o spin desse sítio antiparalelamente com o campo local.

Repete-se o procedimento até que a diferença de energia em cada sítio após a varredura seja menor que um valor fixo (usou-se $1 \cdot 10^{-5}$).

1.9 Estrutura dos programas

Cada programa completo, cuja estrutura mostrada na figura 6, começa definindo com uma lista de temperaturas e vários parâmetros, tal como o tamanho do lado L da rede, os parâmetros de ligação J_1 e J_2 , o número de varreduras de termalização N_{LIXO} e de amostragem $NVAR$, entre outros. Em seguida, constroem-se as redes de vizinhos, duas matrizes $L^2 \times 4$ que guardam os quatro vizinhos de cada um dos L^2 sítios, uma para primeiros e outra para segundos vizinhos.

O cerne do programa (em laranja) inicia com a leitura de uma temperatura T da lista fornecida, com a qual são feitas N_{LIXO} varreduras de termalização com um algoritmo apropriado (Metropolis, banho térmico ou Wolff) e com o passo microcanônico. Terminadas, são feitas outras $NVAR$. Em cada uma destas, após se aplicarem os algoritmos, calcula-se cada variável termodinâmica de interesse (na figura 6, a energia E), que, por sua vez, é somada a uma acumuladora (na figura, EM). Terminadas as $NVAR$ varreduras, guarda-se em um arquivo o valor médio da variável física ($EM/NVAR$) e a temperatura T correspondente, reinicializa-se $EM=0$ e repete-se o cerne com outra temperatura.

Por construção, o fluxo de execução sai do cerne na última e mais baixa temperatura da lista. Assim, o sistema está em uma configuração apropriada para ser minimizado, com menor chance de ficar preso em mínimos locais.

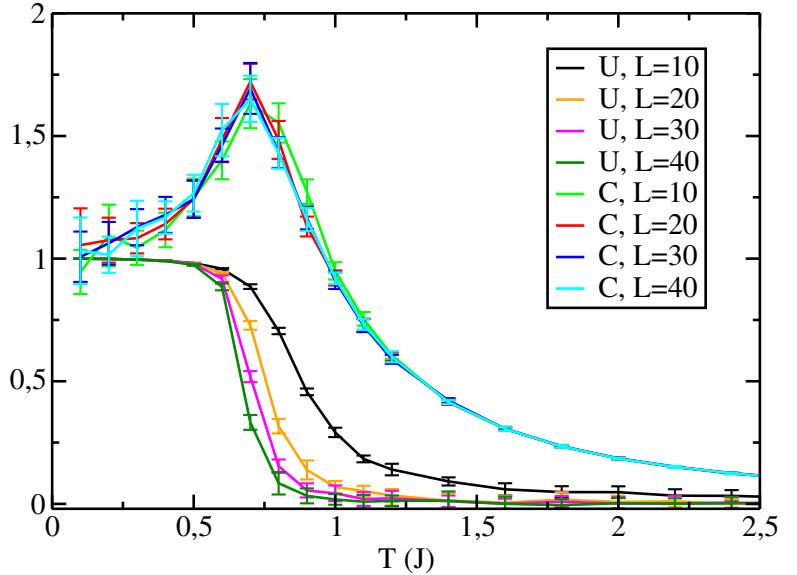
A etapa de termalização garante que a configuração de spins é representativa da temperatura em que está. Afinal, cada vez que o cerne é invocado para uma temperatura T , o sistema acabou de ser simulado várias em uma outra temperatura, próxima porém diferente de T . Suprimir essa etapa resultaria na adulteração das médias, porque seriam coletadas diversas configurações correlacionadas a sistemas em outra temperatura.

Com exceção do gerador de números pseudoaleatórios KISS05 [3], os códigos para as simulações foram todos integralmente escritos pelo autor em FORTRAN 90.

Figura 6: Estrutura de um programa incorporando um algoritmo de Monte Carlo.



Figura 7: Coeficiente de Binder U e calor específico C de redes $L \times L$ em função da temperatura T no modelo de Heisenberg ($J_1; J_2 = (1; 0)$) usando o algoritmo de Metropolis. As curvas são características da ausência de transição de fase.



1.10 Cálculo das barras de erros

Para a determinação do erro da medida foi adotado o método de blocagem, que consiste em subdividir as varreduras de amostragem NVAR em NSUB blocos e calcular a flutuação de cada variável termodinâmica com base nas médias em cada um desses blocos. Então, o desvio padrão da variável X é

$$\sigma_X = \sqrt{\frac{1}{NSUB - 1} (\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle)^2} \quad (15)$$

Tal método foi escolhido porque há quantidades que não são definidas a cada instante de tempo — isto é, a cada varredura de Monte Carlo — como por exemplo o calor específico e a susceptibilidade magnética.

Além disso, configurações separadas por curtos intervalos de tempo estão correlacionadas. Já que as configurações em diferentes blocos estão descorrelacionadas, nota-se que a blocagem é uma maneira adequada de tratar os dados.

2 Análise do modelo de Heisenberg com apenas primeiros vizinhos

No modelo de primeiros vizinhos, foram utilizados $J_1 = 1$ e, obviamente, $J_2 = 0$.

A mais notável consequência de fornecer aos spins liberdade rotacional é a perda da transição de fase, como se verifica na análise do cumulante de Binder, o qual não apresenta intersecções, e do calor específico, cujas curvas pouco mudam com L (gráfico 7).

Por agora os spins terem liberdade rotacional nos ângulos θ e ϕ , pode-se expandir a contribuição de cada spin para a energia em série de Taylor:

$$E(\theta, \phi) \approx E(\theta_0, \phi_0) + E_\theta(\theta_0, \phi_0)(\theta - \theta_0) + E_\phi(\theta_0, \phi_0)(\phi - \phi_0) + \frac{1}{2} [E_{\theta\theta}(\theta_0, \phi_0)(\theta - \theta_0)^2 + E_{\phi\phi}(\theta_0, \phi_0)(\phi - \phi_0)^2 + 2E_{\theta\phi}(\theta_0, \phi_0)(\theta - \theta_0)(\phi - \phi_0)]$$

Visto que a expansão é válida para $T \rightarrow 0$ e que na temperatura zero $E(\theta, \phi)$ está em um mínimo, os termos lineares são nulos.

Como tratamos os spins como vetores clássicos, o teorema da equipartição da energia associa a cada termo quadrático $k_B T / 2$ de energia média, então, somando a contribuição dos N_{sit} spins da rede, prevê-se $N_{sit} k_B$ para o calor específico total e k_B para o calor específico por sítio. Assim, enquanto no modelo de Ising o calor específico parte da origem, no de Heisenberg deve partir de (0,1) (lembmando que fizemos $k_B = 1$), e isso é justamente o observado no gráfico 7.

3 Análise do modelo de Heisenberg com segundos vizinhos

É documentado na literatura [1] que uma transição de fase ocorre se $J_2/J_1 > 0,5$ e não ocorre se $J_2/J_1 < 0,5$, o que foi reproduzido neste estudo. A diferença entre esses dois casos é o estado fundamental, que é a fase de Néel, se $J_2/J_1 < 0,5$, e a fase de tiras, se $J_2/J_1 > 0,5$ (figura 3). Os resultados são exibidos nos gráficos, 8, 9 e 10, com $J_2 = 0,25, 0,55$ e $0,6$.

Figura 8: Coeficiente de Binder U e calor específico C de redes LxL em função da temperatura T no modelo de Heisenberg com $(J_1; J_2) = (1; 0,25)$ usando o algoritmo do banho térmico.

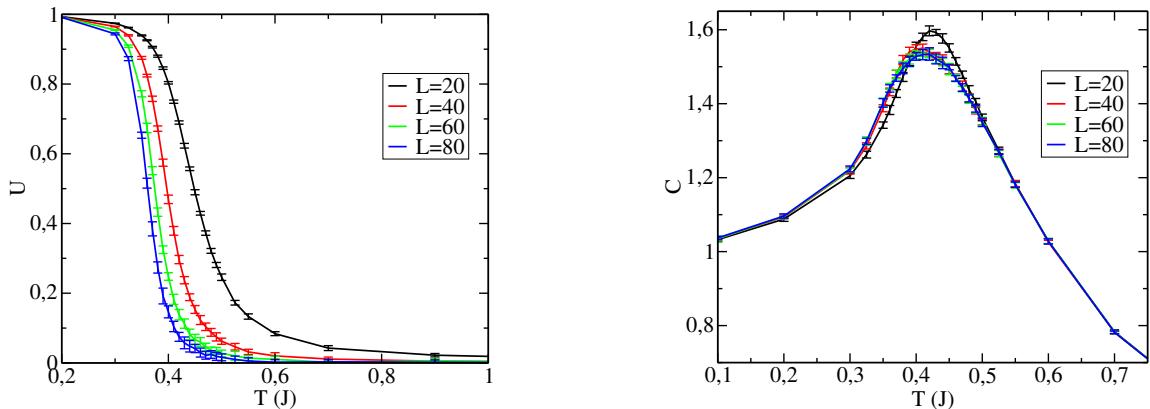
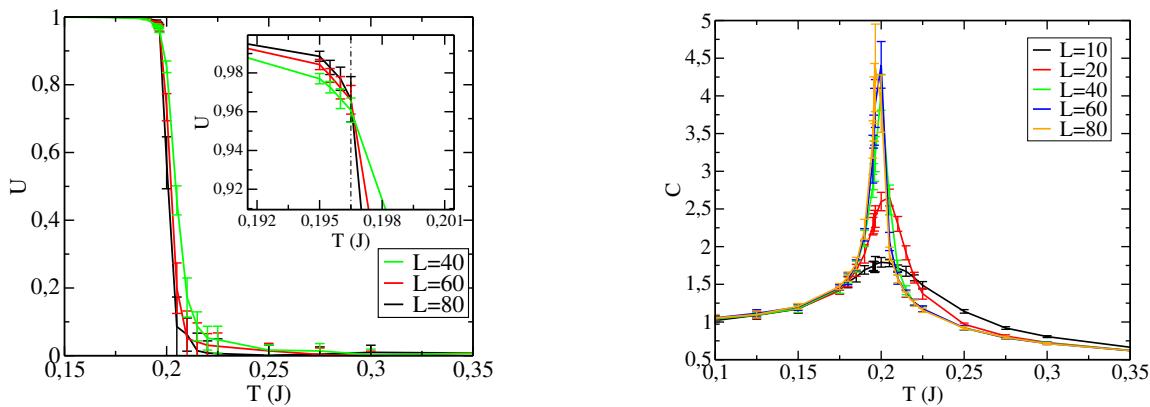
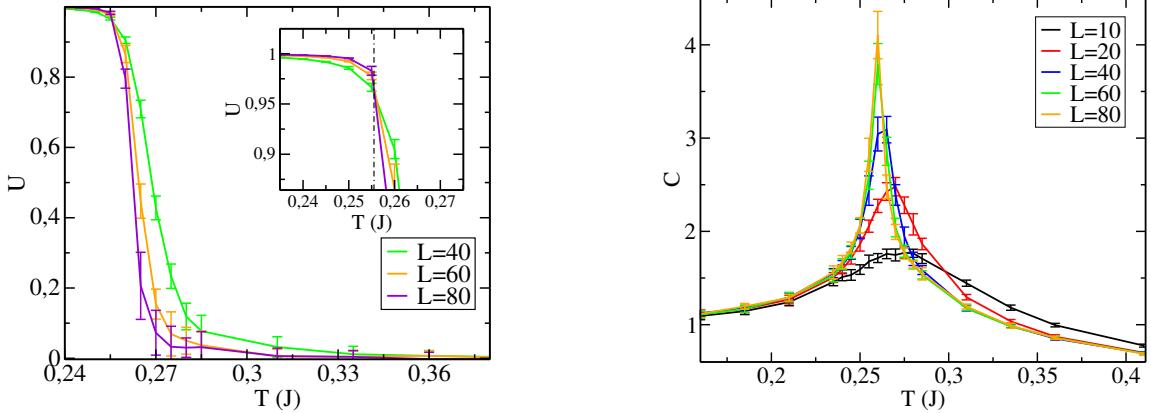


Figura 9: Coeficiente de Binder U e calor específico C de redes LxL em função da temperatura T no modelo de Heisenberg com $(J_1; J_2) = (1; 0,55)$ usando o algoritmo de Metropolis.



É imediato verificar que uma transição de fase ocorre para $J_2 = 0,55$ e $J_2 = 0,60$. Analisando os gráficos de U , as temperaturas críticas são determinadas: para $(J_1; J_2) = (1; 0,55)$, $T_c = 0,197 \pm 0,001$, e para $(J_1; J_2) = (1; 0,60)$, $T_c = 0,255 \pm 0,001$. Tais temperaturas críticas contrastam com a do modelo de Ising clássico (com

Figura 10: Coeficiente de Binder U e calor específico C de redes LxL em função da temperatura T no modelo de Heisenberg com $(J_1; J_2) = (1; 0,60)$ usando o algoritmo de Metropolis.



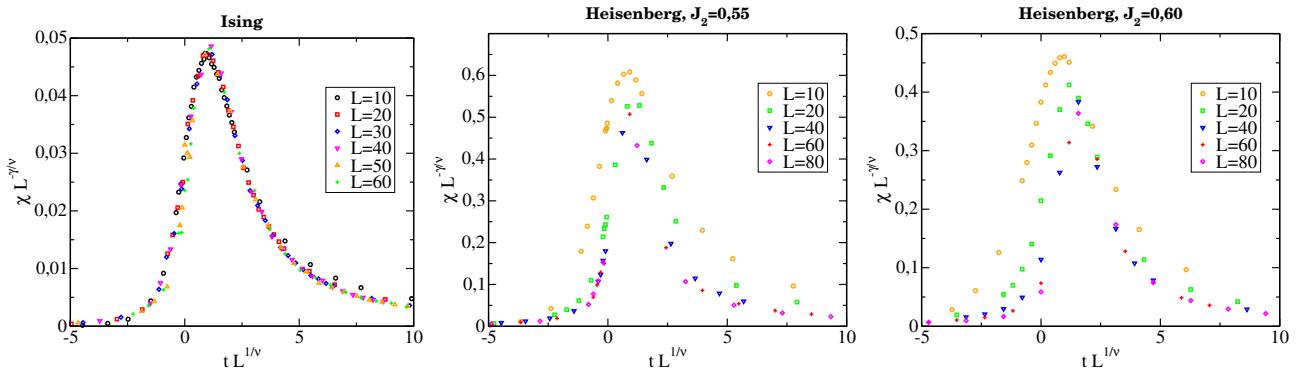
$(J_1; J_2) = (1; 0)$), cuja T_c é aproximadamente dez vezes maior. Essa diferença é devida à frustração e torna mais demorada a execução dos algoritmos de amostragem.

Os estados fundamentais, obtidos por meio do algoritmo de minimização, são degenerados. Constituem de tiras horizontais ou verticais, que são denotados ordenamentos $Q = (0, \pi)$ e $Q = (\pi, 0)$. Cada uma dessas fases é bem descrita pelo parâmetro de ordem σ : $\sigma = 1$ para $Q = (0, \pi)$ e $\sigma = -1$ para $Q = (\pi, 0)$ (figura 3). A existência de um parâmetro de ordem discreto sugere uma analogia com o modelo de Ising.

No modelo de Ising clássico também existe uma degenerescência no estado fundamental: todos os spins alinhados "para cima" ou "para baixo". A natureza da degenerescência encontrada nos dois modelos — de Heisenberg para segundos vizinhos com $J_2/J_1 > 0,5$ e de Ising ferromagnético — é a mesma, originada pela simetria discreta entre as tiras $Q = (0, \pi)$ e $Q = (\pi, 0)$, no primeiro, e entre os estados todos "para cima" e todos "para baixo" no segundo. Assim, faz sentido esperar a transição observada neste modelo de Heisenberg com $J_2/J_1 > 0,5$ e que ela seja do mesmo tipo da transição de Ising.

A fim de confirmar essa hipótese, pode-se fazer um escalonamento de tamanho finito e observar se os mesmos expoentes críticos do modelo de Ising ($\alpha = 0$, $\beta = 1/8$, $\gamma = 7/4$, $\nu = 1$) produzem bons resultados (figura 11). Embora o encaixe das curvas não seja perfeito devido à supressão de T_c no modelo de Heisenberg, percebe-se que há consistência na hipótese.

Figura 11: Escalonamentos para o modelo de Ising com $J_1 = 1$ à esquerda e para o de Heisenberg com $(J_1; J_2) = (1; 0,55)$ ao centro e $(J_1; J_2) = (1; 0,60)$ à direita, realizados a partir da susceptibilidade χ , da temperatura crítica T_c (2,26 para Ising, 0,197 e 0,255 para Heisenberg), da temperatura de simulação T , com $t = T/T_c - 1$, e do tamanho L de cada rede LxL. Os expoentes críticos são os de Ising, $\gamma = 7/4$ e $\nu = 1$. O encaixe das curvas de Heisenberg indicam que as transições nos dois casos são de mesma natureza de Ising.



3.1 Introdução de desordem

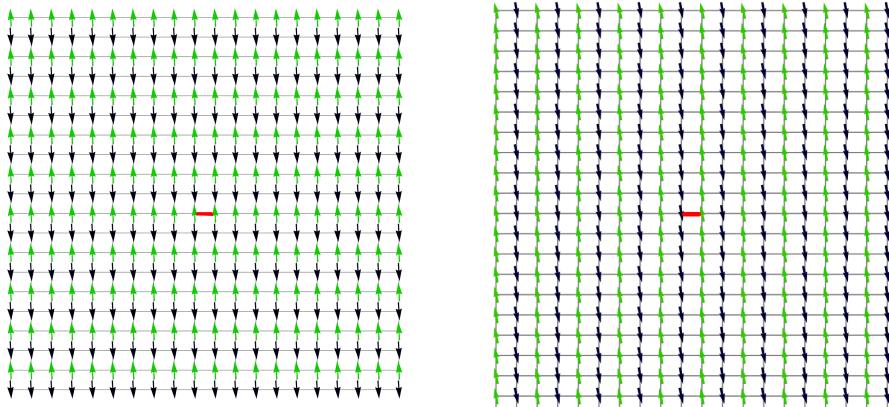
Introduz-se desordem no modelo ao alterar o $J_1 \rightarrow J_1(1 + \Delta)$ de uma única ligação horizontal da rede, e observa-se que ainda são encontradas as fases $Q = (0, \pi)$ e $Q = (\pi, 0)$ (figura 12), embora neste caso a energia não seja a mesma para ambas.

Da figura 12, a energia por sítio da configuração de tiras seria $-2J_2$ na ausência da ligação defeituosa — é evidente que a parcela correspondente a J_1 na expressão (7) seria nula. Considerar a ligação defeituosa introduz um fator $+J_1\Delta/N_{sit}$ se as tiras forem verticais e $-J_1\Delta/N_{sit}$ se horizontais. Assim, nas condições de $\Delta = 0,5$, $J_1 = 1$, $N_{sit} = 1600$ apresentadas na figura 12, a energia por sítio é $E = -2J_2 \pm J_1\Delta/N_{sit} = -1,103125$ ou $-1,096875$. Conforme mostra a tabela 1, isso é de fato observado.

Tabela 1: Energia de redes 40x40 minimizadas no modelo de Heisenberg com $(J_1, J_2) = (1; 0,55)$ com J_1 de uma única ligação alterado de 1 para 6. Um ordenamento tem mais baixa energia e por isso as fases de tiras deixam de ser degeneradas.

Ordenamento	# Configurações	Energia esperada	Menor energia obtida	Maior energia obtida
$Q = (\pi, 0)$	7	$-1,1031250$	$-1,1031247$	$-1,1031162$
$Q = (0, \pi)$	3	$-1,0968750$	$-1,0968847$	$-1,0968757$

Figura 12: Projeções no plano XY do modelo de Heisenberg com $(J_1, J_2) = (1; 0,55)$ e uma ligação cujo J_1 foi alterado de 1 para 6, a qual é destacada em vermelho. À esquerda, ordenamento $Q = (0, \pi)$, e à direita, $Q = (\pi, 0)$. Este último passa a ter menor energia e portanto as duas fases de tiras não são mais degeneradas. A cor indica a direção do spin e o tamanho da seta, a magnitude da sua projeção.



Assim, uma única ligação defeituosa basta para a quebra da degenerescência do estado fundamental em um sistema finito, o que sugere que a transição de fase pode ser perdida também.

3.2 Aumento da desordem

Agora o valor de J_1 de cada ligação da rede é alterado conforme a regra

$$\begin{aligned} J_1 &\rightarrow J_1(1 + \Delta), \text{ se } r < 0,5 \\ J_1 &\rightarrow J_1(1 - \Delta), \text{ se } r > 0,5 \end{aligned} \tag{16}$$

em que $r \in [0, 1]$ é um número pseudoaleatório. Assim, em vez do escalar J_1 , passa-se a ter a matriz J_1^{ij} , em que a entrada ij dá o parâmetro da ligação entre os spins i e j . Com essa alteração, efeitos curiosos podem ser observados.

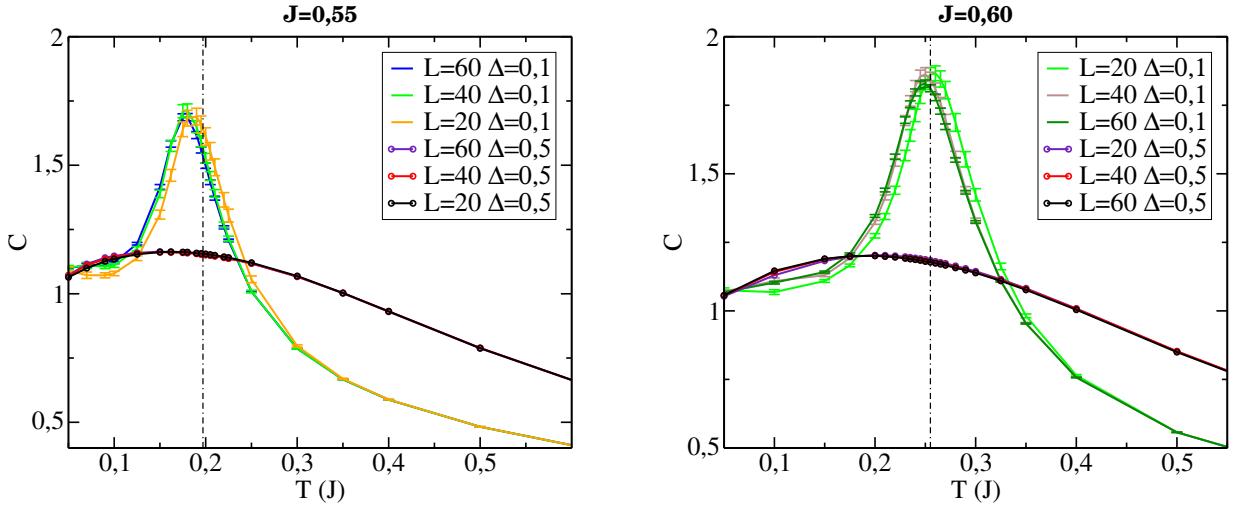
Devido ao caráter aleatório do experimento, o processo todo, que antes da introdução da desordem estava sendo feito em uma configuração apenas, passa a ser realizado repetidas vezes em várias configurações, cada qual com uma matriz de J_1^{ij} diferente. Assim, o calor específico e o coeficiente de Binder apresentados a seguir são as médias dos seus respectivos valores sobre o número de configurações. A quantidade de configurações amostradas em função de J_2 , L e Δ consta na tabela 2.

Tabela 2: Número de configurações de diferentes J_1^{ij} utilizadas na simulação.

J_2	L	Δ	# Configurações	J_2	L	Δ	# Configurações
0,55	20	0,1	385	0,60	20	0,1	400
0,55	20	0,5	380	0,60	20	0,5	380
0,55	30	0,1	290	0,60	30	0,1	300
0,55	30	0,5	295	0,60	30	0,5	280
0,55	40	0,1	180	0,60	40	0,1	185
0,55	40	0,5	190	0,60	40	0,5	180
0,55	60	0,1	150	0,60	60	0,1	150
0,55	60	0,5	160	0,60	60	0,5	155

O coeficiente de Binder (gráfico 14) sugere ausência de transição de fase, embora as barras de erro dificultem afirmar isso com certeza. A curva do calor específico (gráfico 13), entretanto, não deixa dúvidas de que a transição foi de fato destruída, pois os picos não aumentam com o tamanho L da rede e, além disso, com o aumento de Δ , são aplinados.

Figura 13: Calor específico C, obtido pelo algoritmo do banho térmico, de redes LxL em função da temperatura T com $J_2 = 0,55$ ou $J_2 = 0,60$ e desordem generalizada: para cada ligação J_1 é escolhido aleatoriamente entre $1 + \Delta$ e $1 - \Delta$. Indica a ausência de transição de fase. A linha tracejada identifica T_c no caso sem desordem.



As minimizações com $\Delta = 0,5$ mostram configurações bastante desordenadas, em que, contudo, podem ser encontradas regiões com spins formando um padrão, denominadas domínios de spin. Quando $\Delta = 0,1$, os domínios são expressivamente maiores. (Amostras representativas das minimizações estão nas figuras 16 e 17, em que as projeções dos spins no plano XY foram todas normalizadas em um mesmo comprimento para melhor visualização.) Isso é endossado pelo gráfico da magnetização $|\sigma|$, dada por (8), na figura 15. Ela é atenuada para um maior valor de Δ , sugerindo uma redução na prevalência e extensão domínios de tiras. Portanto, como esperado, os dados coletados permitem afirmar que a desordem será maior quanto maior for Δ .

O valor absoluto de σ foi usado porque o sistema é inicialmente isotrópico e, mesmo após a adição da desordem (16), as fases $Q = (0, \pi)$ e $Q = (\pi, 0)$ continuam sendo equiprováveis. Como uma tem $\sigma = 1$ e outra

Figura 14: Coeficiente de Binder U, obtido pelo algoritmo do banho térmico, de redes LxL em função da temperatura T com $J_2 = 0,55$ ou $J_2 = 0,60$ e desordem generalizada: para cada ligação J_1 é escolhido aleatoriamente entre $1 + \Delta$ e $1 - \Delta$, $\Delta = 0,1$. Indica a ausência de transição de fase. A linha tracejada identifica T_c no caso sem desordem.

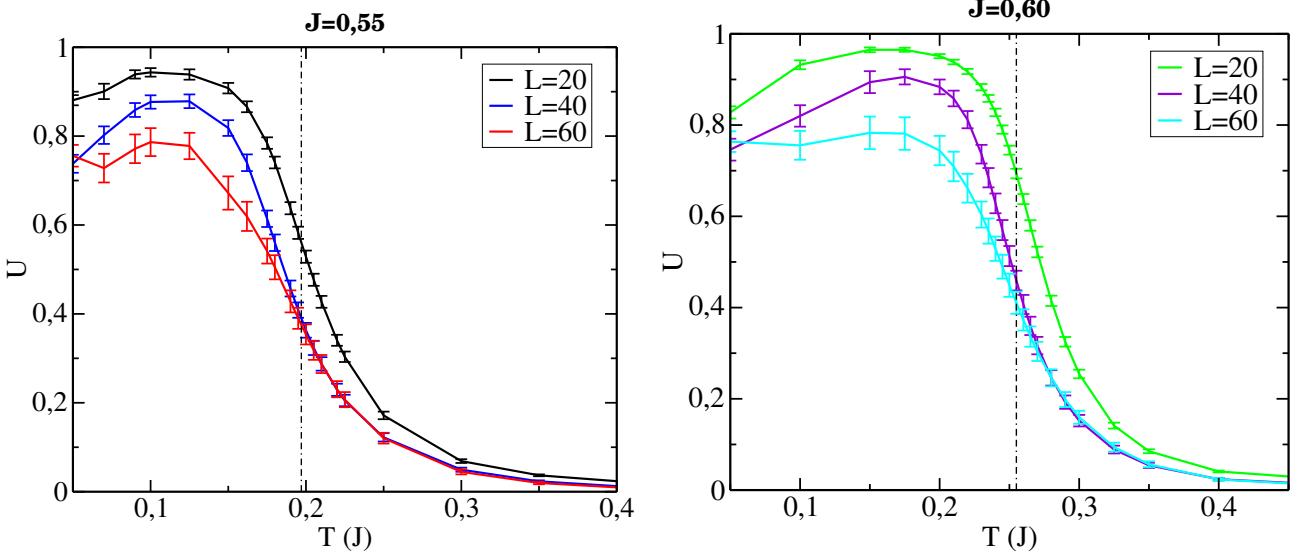
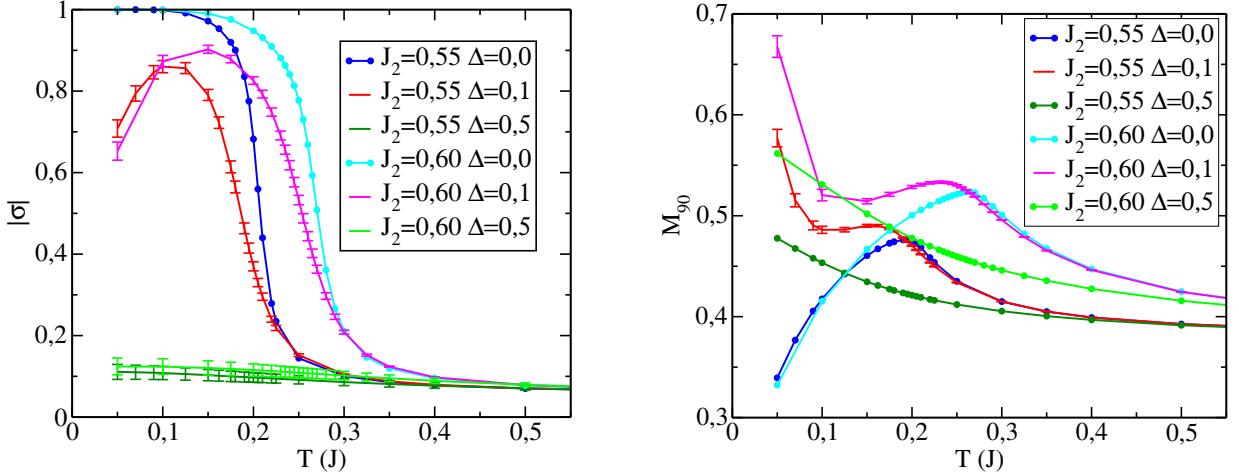


Figura 15: $|\sigma|$ e M_{90} , obtidos pelo algoritmo do banho térmico, de redes 20x20 em função da temperatura T com $J_2 = 0,55$ e $J_2 = 0,60$ e desordem generalizada: para cada ligação J_1 é escolhido aleatoriamente entre $1 + \Delta$ e $1 - \Delta$.



$\sigma = -1$, o valor da média de σ sobre as configurações seria nulo.

No gráfico de $|\sigma|$ chama a atenção a recessão do parâmetro de ordem para $\Delta = 0,1$ em baixas temperaturas, menores que $T = 0,15$ para $J_2 = 0,60$ e menores que $T = 0,10$ para $J_2 = 0,55$. Esse curioso efeito é entendido com um outro parâmetro de ordem,

$$M_{90} = |(\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_k) \wedge (\mathbf{S}_j - \mathbf{S}_l)|/4$$

indicativo de uma outra fase, a anticolinear (figura 3), cuja aparição é documentada em redes com vacâncias [4]. Assim como as vacâncias, a desordem faz com que M_{90} cresça justamente na região mencionada, em que $|\sigma|$ decresce (figura 15), parcialmente suprimindo a ordem das tiras e sugerindo uma associatividade entre

vacâncias e desordem nos acoplamentos. Nesta investigação, limitou-se apenas a constatá-la como justificativa para a recessão de $|\sigma|$.

Verifica-se, ainda, que M_{90} é monótona se $\Delta = 0,5$, de forma que, nesse caso, a curva de $|\sigma|$ também é monótona.

Figura 16: Projeções normalizadas no plano XY de configurações minimizadas do modelo de Heisenberg de segundos vizinhos com desordem em toda a rede 20x20, com $(J_1; J_2) = (1; 0,55)$ e $\Delta = 0,1$. A cor indica a direção do spin. O retângulo rosa indica um domínio anticolinear e o preto, um de tiras.

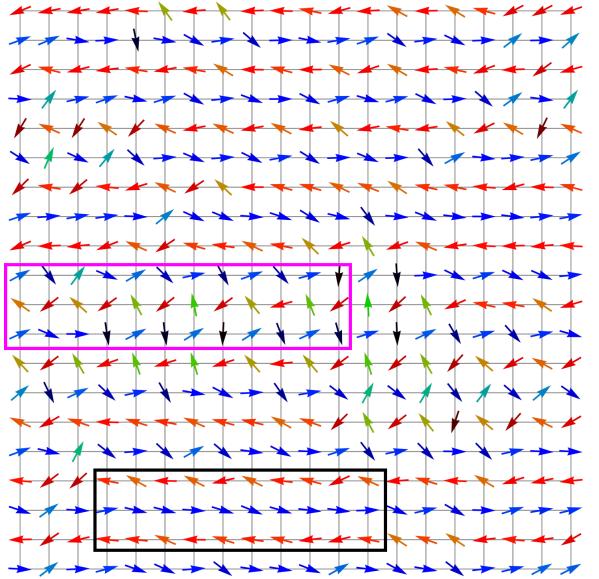
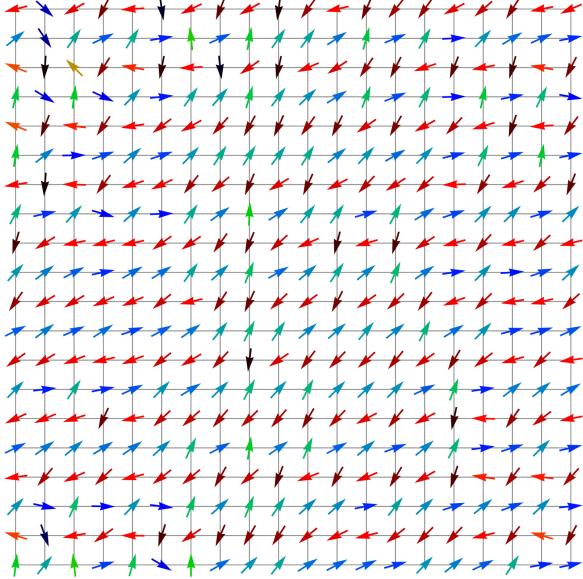
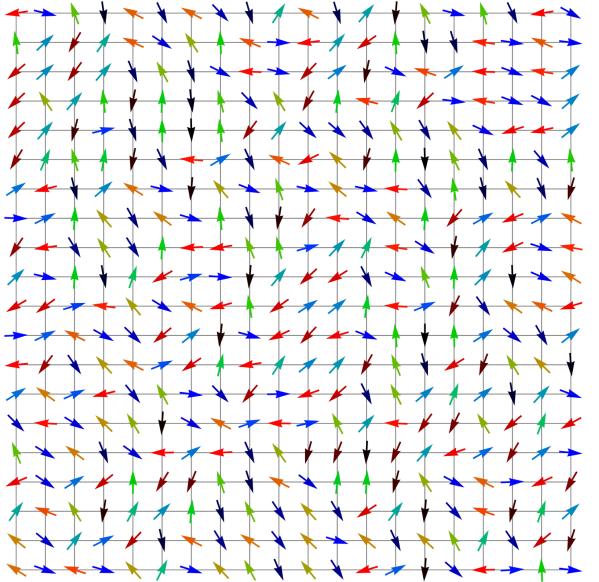
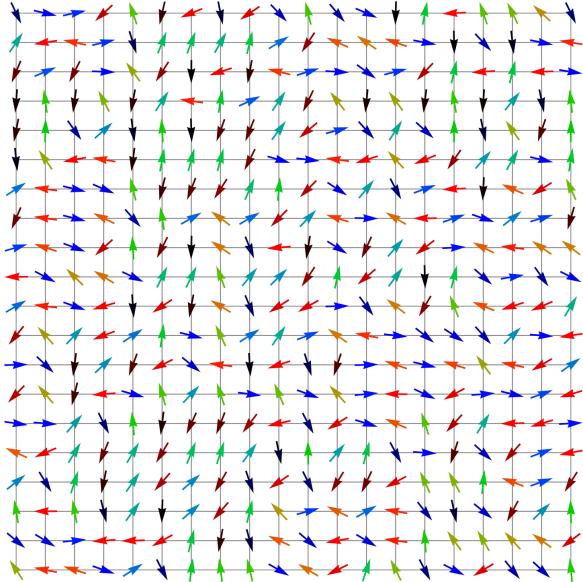


Figura 17: Projeções normalizadas no plano XY de configurações minimizadas do modelo de Heisenberg de segundos vizinhos com desordem em toda a rede 20x20, com $(J_1; J_2) = (1; 0,55)$ e $\Delta = 0,5$. A cor indica a direção do spin.



4 Conclusões

Foram estudados spins em redes bidimensionais quadradas LxL. No modelo de Heisenberg de primeiros vizinhos, diferentemente do modelo de Ising, confere-se aos spins liberdade rotacional, e como consequência ocorre a perda da transição de fase.

Se adicionada a interação entre segundos vizinhos ao modelo de Heisenberg, uma transição ocorre se $J_2/J_1 > 0,5$. Nesse caso, é detectada por um outro parâmetro de ordem, denotado σ . Os estados fundamentais são de tiras horizontais ou verticais (ordenamentos $Q = (0, \pi)$ ou $Q = (\pi, 0)$) e, tal qual no modelo de Ising, a simetria entre os estados fundamentais é discreta. Isso sugere que a transição seja de mesma natureza que no modelo de Ising, o que é confirmado pelo escalonamento de tamanho finito.

A introdução de uma ligação defeituosa quebra a degenerescência do estado fundamental em um sistema finito, embora os dois estados de tiras continuem aparecendo. Quando todas as ligações de primeiro vizinho são alteradas, perde-se a transição, e alterações mais vigorosas (com um parâmetro Δ maior) geram configurações minimizadas mais aleatórias, com domínios menores. Isso sugere que a transição de fase que aparece pela frustração não sobrevive à introdução de desordem. Esse é um resultado interessante a ser explorado pelo grupo no futuro.

5 Apêndice: Algoritmo de Wolff

Durante este projeto, também foi implementado o algoritmo de Wolff, o qual, diferentemente de Metropolis e banho térmico, é um algoritmo que gira aglomerados de spins em vez de spins individuais.

A descrição mais simples se dá, naturalmente, no modelo de Ising. Inicialmente apenas um spin da rede, escolhido aleatoriamente e denominado semente, integra o aglomerado. Cada vizinho seu é então considerado. Se estiver na mesma direção da semente, é adicionado ao aglomerado com probabilidade P_{adc} . Cada novo integrante do aglomerado é selecionado uma única vez e tem seus vizinhos também considerados e adicionados ao aglomerado com probabilidade P_{adc} . O processo só acaba quando todos os spins do aglomerado tiverem sido selecionados uma vez. No fim, tem-se um aglomerado como o da figura 18.

Para determinar a razão entre as probabilidades de seleção g_{ab} e g_{ba} , considere a como o estado dado na figura 18 e b como aquele em que os spins adicionados ao aglomerado foram virados. Sejam p as ligações quebradas no processo $a \rightarrow b$ e q em $b \rightarrow a$. A probabilidade de não adicionar os spins das ligações quebradas por $a \rightarrow b$ é $(1 - P_{adc})^p$; por $b \rightarrow a$, $(1 - P_{adc})^q$. Portanto,

$$\frac{A_{ab}g_{ab}}{A_{ba}g_{ba}} = \frac{A_{ab}}{A_{ba}}(1 - P_{adc})^{p-q} = \exp[-\beta(E_b - E_a)] \quad (17)$$

Para cada uma das p ligações quebradas, a energia inicial era $-J$ e a final, $+J$, resultando em um saldo $+2J$ de energia após a alteração. O restante das ligações, que são q , dão um saldo $-2J$. Assim, $E_b - E_a = 2J(p - q)$ e

$$\frac{A_{ab}g_{ab}}{A_{ba}g_{ba}} = \frac{A_{ab}}{A_{ba}}(1 - P_{adc})^{p-q} = \exp[-2J\beta(p - q)] \quad (18)$$

Rearranjando os termos, obtém-se a razão das taxas de aceitação

$$\frac{A_{ab}}{A_{ba}} = [(1 - P_{adc})e^{2J\beta}]^{q-p} \quad (19)$$

Então convenientemente faz-se $P_{adc} = 1 - e^{-2J\beta}$, de modo que o lado direito de (19) é 1 e se pode escolher a melhor taxa de aceitação possível, $A_{ab} = 1 = A_{ba}$, ou seja, todo aglomerado gerado é sempre virado.

Constata-se que a ergodicidade do algoritmo é satisfeita tomando um aglomerado de apenas um spin, de forma análoga ao que acontece no Metropolis.

Figura 18: Um aglomerado, marcado com 'X', gerado pelo algoritmo de Wolff no modelo de Ising. Cada cor indica uma das duas orientações de spin, e os traços azuis-claro mostram ligações que serão quebradas ao girar o aglomerado.

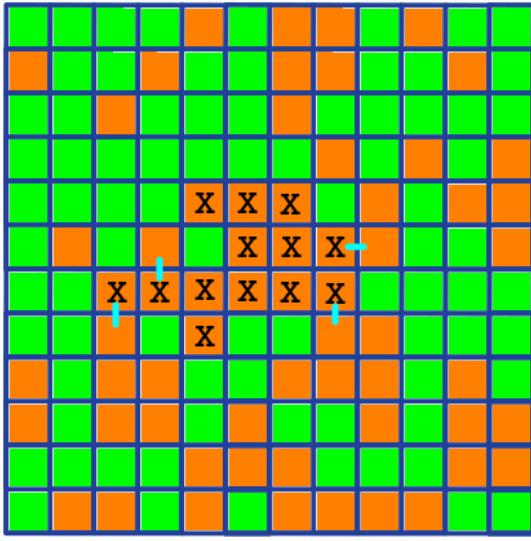
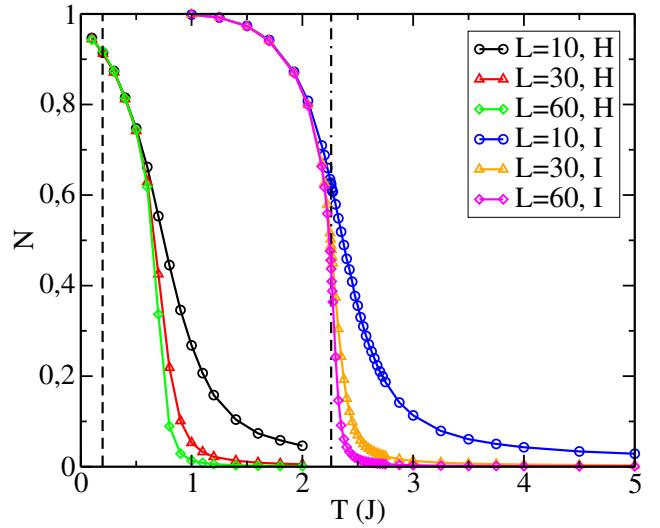


Figura 19: Número N de sítios do aglomerado por sítios da rede $L \times L$ em função da temperatura T com o algoritmo de Wolff no modelo de Ising (I) ferromagnético, $(J_1; J_2) = (1; 0)$, ou Heisenberg (H) com segundos vizinhos, $(J_1; J_2) = (1; 0,55)$. As linhas tracejadas demarcam T_c .



5.1 Implementação no modelo de Heisenberg

Em uma rede quadrada de spins, de dimensões $L \times L$,

1. Gera-se uma direção $\mathbf{d} = (x, y, z)$ aleatória, com $|\mathbf{d}| = 1$;
2. Cria-se uma variável chamada aglomerado;
3. Um sítio aleatório da rede, denominado semente, é colocado no aglomerado;
4. Para cada spin \mathbf{S}_i no aglomerado, verifica-se cada vizinho \mathbf{S}_j , o qual é adicionado ao aglomerado com probabilidade $P = 1 - \exp^{-\frac{2J}{kT}(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{d})(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{d})}$;
5. Invertem-se todos os spins do aglomerado.

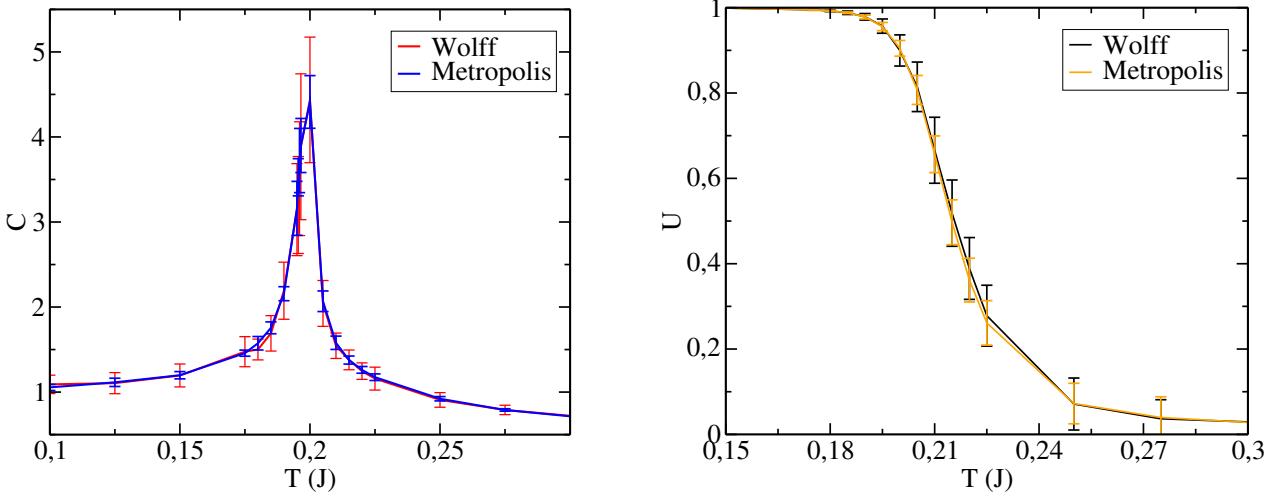
N é o número de elementos no aglomerado consolidado dividido pelo número de sítios da rede após a varredura. Diferentemente do algoritmo de Metropolis, o de Wolff em geral não visita todo sítio da rede em cada varredura.

5.2 Resultados – Wolff

O algoritmo de Wolff visa a otimizar a análise para temperaturas próximas à crítica, reduzindo as barras de erro perto da transição em comparação ao de Metropolis. Evidentemente, os valores em si devem ficar inalterados, e é isso que se observa na figura 20.

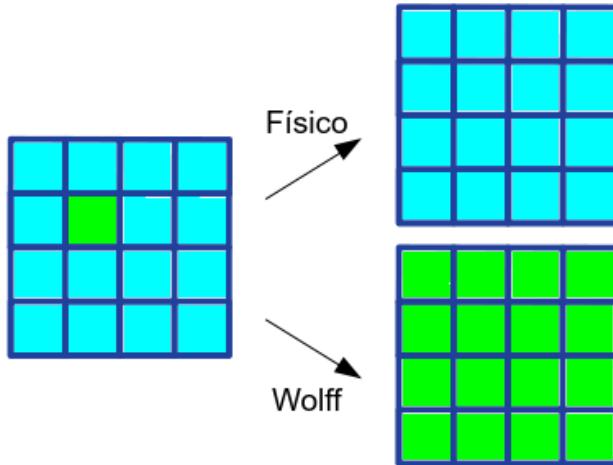
Uma medida importante para aferir a eficiência do algoritmo é o tamanho do aglomerado. No modelo de Ising, à proporção que a temperatura diminui, ele aumenta pois os spins tendem a estar alinhados, principalmente em $T < T_c$. O contrário ocorre para $T > T_c$ (gráfico 19). Entretanto, no de Heisenberg nota-se que na região

Figura 20: Calor específico C de uma rede 60×60 e coeficiente de Binder U de uma rede 20×20 em função da temperatura T para o modelo de Heisenberg com $(J_1; J_2) = (1; 0,55)$. Os dados foram obtidos com os mesmos números de amostragens NVAR e NLIX0, mas as barras de erro são menores em Metropolis.



da transição, cuja temperatura crítica é dez vezes menor que no modelo de Ising, o aglomerado já abarca quase toda a rede, de forma que o procedimento fica ineficiente, levando mais tempo em relação ao de Metropolis. Nesse caso, o Wolff se comporta como representado na figura 21, virando um grande número de spins orientados igualmente em vez de virar aqueles poucos que estão contrários à direção da maioria. Embora tal processo seja ineficiente e contraste com o fenômeno que ocorre fisicamente, ele não acarreta erros de medição, pois a energia e a magnetização, esta tomada em valor absoluto, são as mesmas. Ainda assim, como não há melhora nos resultados — ao contrário, as barras de erro ficam maiores em relação ao de Metropolis, como mostra a figura 20 —, sua aplicação não se justifica, e é por isso que se recorreu apenas a Metropolis e banho térmico para as análises centrais deste estudo.

Figura 21: Comparação entre o sistema real e o simulado pelo algoritmo de Wolff no modelo de Heisenberg em temperaturas próximas à crítica. Wolff vira os spins na direção dominante, enquanto o sistema real tende a virar os poucos spins que não apontam na direção dominante.



Referências

- [1] WÉBER, C. et al. **Ising transition driven by frustration in a 2D classical model with continuous symmetry**. Physical Review Letters, Vol. 91, pp. 177202 (2003).
- [2] GEORGE, M. **Choosing a point from the surface of a sphere**. The Annals of Mathematical Statistics, Vol. 43 (2), pp. 645-646 (1972).
- [3] **Gerador de números aleatórios KISS**, descrito em [en.wikipedia.org/wiki/KISS_\(algorithm\)](https://en.wikipedia.org/wiki/KISS_(algorithm)). Versão para FORTRAN de Thomas Vojta. Acesso em: 17 out. 2019.
- [4] WÉBER, C.; MILA, F. **Anticollinear magnetic order induced by impurities in the frustrated Heisenberg model of pnictides**. 2012. Disponível em: <https://arxiv.org/abs/1207.0095>. Acesso em: 17 out. 2019.
- [5] LANDAU, D.; BINDER, K. **A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics**. 3. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2009.
- [6] NEWMAN, M.; BARKEMA, G. **Monte Carlo Methods in Statistical Physics**. Oxford: Clarendon Press, 2010.
- [7] GIORDANO, N.; NAKANISHI, H. **Computational Physics**. Upper Saddle River: Pearson/Prentice Hall, 2006.